4.5 행렬 표현 (Matrix Representation)

어떤 물리계의 상태를 표시하는 힐베르트 공간의 기저상태(벡터)들 $\{|\phi_n>\}$이 주어지면, 우리는 통상 다음과 같은 관계를 만족하게 할 수 있다.

$$<\phi_m|\phi_n> = \delta_{mn},\ \sum_n |\phi_n><\phi_n| = 1\ .$$

이러한 관계를 사용하면, 우리는 임의의 연산자 A를 기저상태들로 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$A = \sum_{n,m} |\phi_n><\phi_n|A|\phi_m><\phi_m|$$

여기서 $<\phi_n|A|\phi_m> = A_{nm}$ 으로 표시하면 위식은 다음과 같이 표현되므로,

$$A = \sum_{n,m} A_{nm}\,|\phi_n><\phi_m|$$

기저상태들이 $\{|\phi_n>\}$로 주어진 경우에 n-번째 행과 m-번째 열에 해당하는 행렬요소가 A_{nm}으로 주어지는 행렬로 연산자 A를 대치시킬 수 있다.
즉,

$$\text{연산자 } A \ \Leftrightarrow\ \text{행렬 } \left[A_{nm}\right] = \begin{bmatrix} <\phi_1|A|\phi_1> & <\phi_1|A|\phi_2> & \cdots \\ <\phi_2|A|\phi_1> & <\phi_2|A|\phi_2> & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}\ .$$

여기서 주어진 상태공간이 무한 차원인 경우 행렬은 무한 행렬이 되고, 유한 차원인 경우 유한 행렬이 된다.
여기서 기저상태들이 주어진 연산자 A의 고유벡터들이라고 생각하여 보자.

$$A|\phi_n> = a_n|\phi_n>$$

그러면, $A_{nm} = <\phi_n|A|\phi_m> = a_m\delta_{nm}$ 이 되어 해당 행렬이 대각행렬이 된다.
여기서 $A = \sum_n a_n\,|\phi_n><\phi_n|$ 이므로, 우리가 기저벡터 $|\phi_n>$ 을 n번째 열이 1이고 나머지는 모두 0인 열벡터(column vector)로 생각하면, $<\phi_n|$ 은 $|\phi_n>$ 의 전치행렬(transposed matrix)에 해당하므로 우리는 다음과 같이 됨을 알 수 있다.

$$A = \sum_n a_n\,|\phi_n><\phi_n| = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots \end{bmatrix}$$

이러한 행렬은 위에서 주어진 고유벡터 조건식 $A|\phi_n> = a_n|\phi_n>$ 을 만족한다.

$$A|\phi_n> = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & a_3 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} = a_n\begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} = a_n|\phi_n>$$

한편, 연산자 A와 수반 연산자 (adjoint operator) $A^\dagger$는 다음의 관계를 만족하므로

$$< \phi_n | A | \phi_m >^* = < \phi_m | A^\dagger | \phi_n > \ ,$$

우리는 $A_{nm}^* = A_{mn}^\dagger$ 이 됨을 알 수 있다. 즉, 수반 연산자 $A^\dagger$에 대응하는 행렬은 연산자 A에 대응하는 행렬의 복소공액(complex conjugation)을 취하고 전치한(transposed) 행렬에 해당된다.
